

Title	一軸磁場配向を用いた粉末微結晶の構造解析
Author(s)	菊地, 弘晃
Citation	京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 (2016), 2016: 55-55
Issue Date	2016
URL	http://hdl.handle.net/2433/214361
Right	
Type	Article
Textversion	publisher

一軸磁場配向を用いた粉末微結晶の構造解析

Crystal structure analysis for microcrystalline powder by using
magnetically uniaxial orientation.

京都大学農学研究科森林科学専攻生物繊維学 菊地弘晃

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、タイトルに示したような新規のX線結晶構造解析手法の確立を試みた。

近年、放射光利用による回折データの高分解能化や、解析ソフトウェアの充実により、未知粉末結晶構造解析(*ab initio* 法)が盛んにおこなわれるようになってきた。そこでの大きな課題のひとつが、解析の初期段階でなされる格子定数の決定である。試料によっては、高分解の回折データに種々の指数付けソフトウェアを適用しても正しい格子定数が得られず、その後の段階に進めない場合も多い。単結晶回折像が3次元の逆格子情報をそのまま反映しているのに対し、粉末回折像では逆格子情報が1次元に縮退しているため、分解能の低下は避けがたい。何らかの方法で縮退を2次元にとどめることができれば、分解能の問題が大きく改善される。

そこで本研究では、微結晶試料を磁場(～1T)で一軸配向させ *in-situ* X線回折測定を行い、得られた2次元回折像をもとに格子定数を決定する方法を提案した。この手法により、複数の化合物の格子定数が決定され、いずれも既知の値にほぼ一致した。本手法によって、従来の粉末法では格子定数の決定ができず構造を解くことのできなかった化合物の構造解析が可能になることが予想される。この成果については下に示した国内学会にて発表を行った。また、本研究を含めた包括的な内容について、下に示した国際学会にて報告した。

現在、本手法を用いて構造未知の化合物の構造解析を試みているほか、本研究から派生した複数の研究課題に取り組んでいる。これらについては来年度に成果報告を行う予定である。

国内学会発表

菊地弘晃, 木村史子, 木村恒久 平成 27 年度日本結晶学会年会, ポスター発表 PB-009,
平成 27 年 10 月 17-18 日, 大阪

国際学会発表

Fumiko Kimura, Tsuboi Chiaki, Shu Tsukui, Hiroaki Kikuchi, and Tsunehisa Kimura, The
international Conference on Magneto-Science 2015 (October 27-31, 2015, Matsumoto, Japan)